

# PERLINDUNGAN KULIT DARI SINAR ULTRAVIOLET DENGAN BAHAN TABIR SURYA PRODUK REAKSI ESTERIFIKASI *n*-AMIL ASETAT DAN VERATRALDEHIDA<sup>1</sup>

Ike Yuliasuti<sup>2</sup>, Diana Susanti<sup>2</sup>, dan Agus Dwiono<sup>2</sup>

## INTISARI

Dalam penelitian ini telah dilakukan pemodelan molekular dan sintesis senyawa serta menguji aktivitas tabir surya secara *in vitro* dan *in vivo*. Penelitian dilakukan dengan pemodelan molekul yang dilanjutkan isolasi dan sintesis senyawa dari bahan minyak cengkeh sehingga dihasilkan senyawa-senyawa alkil sinamat. Senyawa tabir surya yang dihasilkan dianalisis dengan menggunakan spektrofotometer IR, Spektrofotometer <sup>1</sup>H NMR dan kromatografi. Dari analisis diperoleh produk yaitu 3,4-metoksi amil sinamat. Analisis *in vitro* senyawa 3,4-metoksi amil sinamat dilakukan dengan spektrometer UV-vis diperoleh hasil senyawa ini memberikan proteksi maksimal pada konsentrasi 25 µg/ mL. Analisis *in vivo* dilakukan pada hewan uji marmut, aktivitas perlindungan terhadap terjadinya eritema membaik pada konsentrasi 30 µg/ mL dengan nilai SPF *in vitro* 20,559. Pada SPF 20 konsentrasi senyawa relatif aman melindungi kulit.

<sup>1</sup>Lomba Karya Inovatif dan Produktif tahun 2002

<sup>2</sup>Mahasiswa Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta  
Dosen Pembimbing: Drs. Iqmal Tahir, M. Si.

## PENDAHULUAN

Indonesia adalah negara yang terletak di daerah tropis dengan paparan sinar matahari sepanjang tahun. Sebagian penduduknya bekerja di luar ruangan sehingga mendapat banyak paparan sinar matahari bahkan pada saat matahari sedang terik. Untuk mencegah efek buruk pajanan sinar matahari dapat dilakukan dengan cara menghindari pajanan berlebihan sinar surya, yaitu tidak berada di luar rumah pada jam 10.00 – 16.00, memakai pelindung fisik seperti tabir surya tropikal apabila memang kegiatan mengharuskan berada di bawah terik matahari (Perwitasari dkk, 1993).

Sinar matahari yang sampai di permukaan bumi dan mempunyai dampak terhadap kulit dibedakan menjadi sinar ultraviolet A (UV-A, λ 320-400 nm). Ultraviolet B (UV-B, λ 290-320 nm) dan ultraviolet C (UV-c, λ 200-290). Pajanan sinar surya mempunyai pengaruh buruk terhadap kulit manusia baik berupa perubahan-perubahan akut seperti eritema, pigmentasi dan fotosensitivitas, maupun efek jangka panjang berupa penuaan dini dan keganasan kulit.

Tabir Surya (TS) adalah suatu substansi yang formulanya mengandung senyawa kimia aktif yang dapat menyerap, menghamburkan atau memantulkan energi sinar matahari yang mengenai kulit manusia.

Senyawa tabir surya yang sudah banyak digunakan dalam industri kosmetika adalah senyawa turunan alkil sinamat, seperti *p*-metoksi oktil sinamat. Senyawa ini efektif menyerap sinar UV-B pada konsentrasi yang relatif rendah yaitu sebesar 2-7,5%, mudah dikombinasikan dengan zat aktif lainnya dan

tidak menyebabkan iritasi pada kulit (Massicotte, 2000).

Senyawa tabir surya dapat disintesis dari bahan-bahan alam. Pada penelitian ini dipilih veratraldehida yang diperoleh dari minyak cengkeh melalui isolasi eugenol.

## METODOLOGI PENELITIAN

### Tujuan Penelitian

1. Melakukan pemodelan molekular dan sintesis senyawa
2. Mengkaji aktivitas tabir surya secara *in vitro* dan *in vivo*.

### Metode Penelitian

#### Pemodelan Molekul

Untuk setiap senyawa yang digunakan sebagai bahan penelitian, dibuat struktur 2D dengan paket program HyperChem. Selanjutnya dilengkapi dengan atom hydrogen pada setiap atom untuk melengkapi struktur sebenarnya dan kemudian dibentuk menjadi struktur 3D.

#### Isolasi dan Sintesis Senyawa

Hal ini dilakukan dengan :

- isolasi eugenol dari minyak cengkeh
- metilasi vanilin untuk membuat veratraldehida
- kondensasi veratraldehida dengan *n*-amil asetat

### Karakteristik Hasil

Analisis struktur senyawa dilakukan dengan spektrometer IR, GC, dan GCMS.

### Pengujian secara *in vitro*

Pengujian dilakukan dengan menentukan nilai SPF serta jenis proteksi tabir surya dari senyawa-senyawa alkil sinamat tersebut.

### Pengujian secara *in vivo*

Digunakan hewan coba marmut yang dibagi menjadi 3 kelompok, yaitu : kontrol positif (diolesi tabir surya), kontrol negatif (tanpa diolesi tabir surya), dan marmut uji (ditetesi senyawa yang diuji).

## HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

### Pendekatan Kimia Komputasi

Perhitungan kimia komputasi yang dilakukan menggunakan paket program Hyperchem versi 5.0, sedangkan metoda yang digunakan adalah semiempirik AM1 (Austin Model 1). Metoda ZINDO/s digunakan untuk perhitungan spektra transisi elektronik karena metoda tersebut merupakan metoda semiempirik yang menyediakan algoritma untuk keperluan tersebut.

Berdasarkan spektra transisi elektronik hasil perhitungan kimia komputasi maka senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat bisa digolongkan sebagai senyawa tabir surya.

### Kajian QSAR (Quantitatif Structure-Activity Relationship)

Salah satu hasil perhitungan dengan menggunakan kimia komputasi akan memberikan data output berupa muatan atom bersih ( $q_x$ ).

Tabel 1. Data muatan bersih atom 3,4 dimetoksi amil sinamat

Isomer amil	Muatan bersih atom					
	$qC_1$	$qC_2$	$qC_3$	$qC_4$	$qC_5$	$qC_6$
CCCC-	-0,084	-0,162	0,049	0,0774	-0,187	-,0092
(C)CCC-	-0,084	-0,162	0,049	0,073	-0,1887	-0,092
C(C)CCC	-0,071	-0,160	0,054	0,072	-0,184	-0,104
CC(-C,-C)C-	-0,084	-0,062	0,049	0,073	-0,0184	-0,093

Dari model persamaan QSAR yang dibuat Dwiono (2002) diketahui ada 6 variabel yang berpengaruh sangat kuat terhadap senyawa tabir surya yaitu muatan atom bersih pada atom  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$ ,  $C_4$ ,  $C_5$  dan  $C_6$  (atom penyusun benzena). Senyawa turunan amil yang dapat diusulkan untuk disintesis yaitu senyawa 3,4 dimetoksi amil sinamat dengan gugus alkil adalah *n*-amil.

### Sintesis Senyawa

#### Sintesis amil asetat

Reaksi esterifikasi dilakukan terhadap asam asetat glasial dan pentanol dengan menggunakan katalis  $H_2SO_4$ . Hasil yang diperoleh berupa cairan bening, aroma harum seperti buah pisang dengan rendemen hasil 62,69%.

Hasil yang diperoleh dianalisis dengan menggunakan spektrofotometer IR,  $^1H$  NMR dan kromatografi gas. Hasil analisis dengan spektrofotometer IR (Tabel 2) menunjukkan telah hilangnya gugus hidroksi (-OH) dari asam dan alkohol. Hasil analisis amil asetat dengan kromatografi gas memberikan satu puncak. Jadi dapat diperkirakan terbentuk satu produk dan senyawa yang dihasilkan memiliki kadar 100%.

Tabel 2. Sifat spektra IR amil asetat

Bilangan gelombang ( $cm^{-1}$ )	Jenis vibrasi
1743,5	Gugus karbonil (C=O) ester
2960,5	Rentangan C—H alkan bengkokan
1467,7	-CH <sub>2</sub> -
1365	Bengkokan -CH <sub>3</sub>
1051,1	Rentangan C—O

Dari hasil interpretasi IR,  $^1H$  NMR dan kromatogram GC dapat disimpulkan bahwa senyawa yang diperoleh sebagai produk esterifikasi amil alkohol dan asam asetat adalah amil asetat.

#### Reaksi kondensasi veratraldehida dengan amil asetat

Reaksi kondensasi dilakukan dengan mencampurkan amil asetat dan veratraldehida. Hasil yang diperoleh adalah cairan berwarna coklat dengan rendemen 51,25%. Produk dianalisis dengan spektrometer IR,  $^1H$  NMR, GC dan GC-MS.

Berdasarkan karakteristik produk yang dihasilkan, senyawa 3,4-dimetoksi sinamat yang merupakan senyawa tabir surya diduga telah terbentuk . produk tersebut kemudian diuji aktivitas tabir surya dengan analisis *in vitro*.

### Analisis *in vitro* Senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat

Tipe aktivitas senyawa dilakukan dengan analisis menggunakan spektrometer UV-vis yang menunjukkan senyawa sinamat memiliki serapan pada panjang gelombang 288 nm dan 322 nm. Hal ini berarti senyawa tersebut tergolong senyawa tabir surya UV-C dan UV-B.

Pengujian aktivitas senyawa hasil dilakukan dengan penentuan nilai SPF. Senyawa hasil diukur

harga absorbansinya pada kisaran konsentrasi 15 µg/ mL sampai dengan 50 µg/ mL dengan pelarut etanol.

### Analisis *in vivo* Senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat

Analisis dilakukan terhadap sifat anti inflamasi senyawa yang diukur dengan skor 0 – 4 untuk daerah kulit yang memberikan respon eritema. Pengukuran menggunakan cara tropikal dengan hewan uji marmut.

Tabel 3. Hasil uji *in vivo* terhadap senyawa-senyawa ester sinamat

No	Senyawa	Konsentrasi	Rerata
1	Kontrol (+)	0,5 µg/ cm <sup>2</sup>	1,4
		2 µg/ cm <sup>2</sup>	0,2
		5 µg/ cm <sup>2</sup>	0,0
2	Kontrol (-)	-	1,9
3	3,4-dimetoksi amil sinamat	20 µg/ mL	0,8
		25 µg/ mL	1,2
		30 µg/ mL	0,8

Aktivitas perlindungan terhadap terjadinya eritema membaik pada konsentrasi 30 µg/ mL dengan nilai SPF<sub>*in vivo*</sub> 20,559. Hal ini karena SPF 20 konsentrasi senyawa masih relatif aman melindungi kulit. Dalam bidang kosmetika, tabir surya dengan nilai SPF 20 dewasa ini sedang dikembangkan karena dapat melindungi kulit terhadap sinar UV sampai 95%. Secara garis besar, dari hasil uji secara *in vivo* ini diketahui bahwa senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat dapat melindungi kulit hewan uji terhadap terjadinya eritema akibat pajanan sinar UV.

### Komparasi Hasil Teoritik dan Eksperimen

Hasil perhitungan komputasi menunjukkan bahwa  $\lambda_{maks}$  senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat adalah 273,5 nm dengan intensitas sebesar 0,307. Dengan demikian senyawa tersebut diduga tergolong senyawa tabir surya UV-C. hasil analisis spektrofotometri UV terhadap produk hasil kondensasi 3,4-dimetoksi benzaldehida dengan amil asetat menunjukkan adanya serapan pada panjang gelombang 288 nm yang berarti termasuk senyawa tabir surya UV-C.

Berdasarkan hasil analisis QSAR, konsentrasi senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat yang mampu memberikan proteksi maksimum yaitu sebesar 0,8662 µg/ mL. berdasarkan analisis *in vitro* terhadap produk yang diduga sebagai senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat menunjukkan bahwa pada konsentrasi sebesar

25 µg/ mL akan memberikan proteksi maksimum. Harga SPF dari senyawa tersebut adalah 12,078.

## KESIMPULAN DAN SARAN

### Kesimpulan

1. Senyawa tabir surya 3,4-dimetoksi amil sinamat dapat dibuat dari reaksi kondensasi veratraldehida dan amil asetat dengan rendemen hasil sebesar 51,25%
2. Berdasarkan analisis *in vitro* maka proteksi senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat terhadap sinar UV yang baik terjadi pada konsentrasi 30 µg/ mL dengan nilai SPF 20.
3. Berdasarkan analisis *in vivo* maka senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat dapat melindungi kulit dari terjadinya eritema akibat pajanan sinar UV.

### Saran

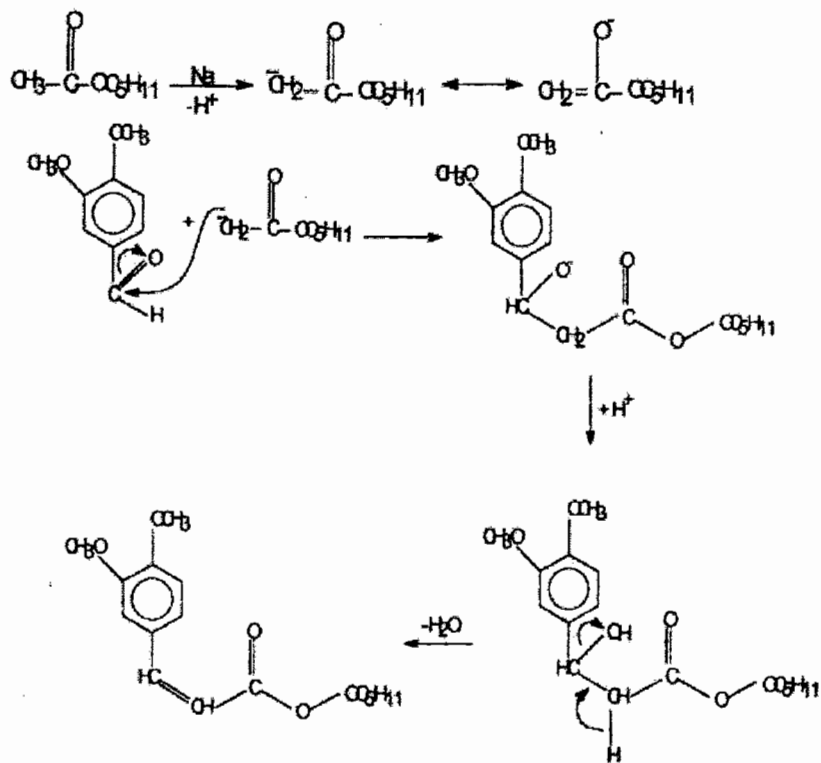
1. hasil reaksi kondensasi menunjukkan rendemen yang relatif kecil. Oleh karena itu perlu dicari langkah sintesis yang lain dalam pembuatan senyawa turunan sinamat yang dapat menghasilkan rendemen yang baik.
2. Mengingat pentingnya senyawa tabir surya bagi kecantikan dan kesehatan maka perlu dilakukan untuk menemukan senyawa tabir surya yang lain selain senyawa turunan sinamat yang aman dan diperoleh dari bahan dasar yang murah.
3. Analisis secara *in vivo* yang dilakukan masih sangat sederhana, untuk itu perlu dikembangkan metode yang lebih baik sehingga diperoleh nilai SPF<sub>*in vivo*</sub> senyawa untuk hasil yang lebih akurat.

## DAFTAR PUSTAKA

- Kubinyi, H., 1993. *QSAR : Hansch Analysis and Related Approach*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim.
- Massicote, A., 2000. *Sun Exposure and Sunscreen*, An Educational Grant from L'Oreal, <http://www.pharmasynconnects.com/content/phpost/2000/06-0/ce-06-00>, diakses Juli 2002.
- Perwitasari, I, Etnawati, K. dan Suyoto, 1993. *Peran Berbagai Faktor Tabir Surya Ultraviolet A dalam Mencegah Pigmentasi Kulit Akibat Pajanan Sinar Ultraviolet A Penelitian pada Kulit Konstitutif*, Kumpulan Naskah Ilmiah Kongres Nasional IX PERDOSKI, Jilid 2. Airlangga University Press, Surabaya.

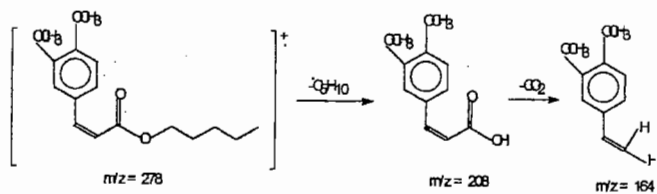
Lampiran

Fragmentasi senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat



Reaksi kondensasi Claisen antara veratraldehida dan amil asetat

Pola fragmentasi I :



Pola fragmentasi II :

